

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Efectos sobre el confinamiento cuántico de
una partícula bajo la acción de un potencial
puntual y un campo eléctrico

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

F I S I C

P R E S E N T A :

Mariana Cano Díaz

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes

México, D.F. 2006



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

A mis asesores de tesis:

Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes. Por todos sus consejos y enseñanzas durante todo el tiempo que tomó el desarrollo de esta tesis, así como su constante apoyo para alentarme a seguir formándome dentro de la disciplina científica.

Dr. Marcelo del Castillo Mussot. Por su constante motivación y por haber brindado el tema en el que se basa esta tesis.

Al jurado:

Dr. Juan Adrián Reyes Cervantes

M. en C. Mirna Villavicencio Torres

Dr. Carlos Ignacio Mendoza Ruíz

Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca

Dr. Alejandro Reyes Esqueda

Por su paciencia en la revisión de esta tesis y por sus acertadas sugerencias para su mejoramiento.

Índice General

0.1	Introducción	4
1	Confinamientos cuánticos simples	6
1.1	Partícula en un pozo infinito de potencial	6
1.2	Potencial puntual atractivo	9
1.2.1	Método convencional	11
1.2.2	Método Integral	13
1.3	Partícula bajo la acción de un campo eléctrico	17
2	Partícula en un pozo bajo la acción de un potencial puntual	19
2.1	Confinamiento por un pozo y un potencial puntual	19
2.2	Solución para energías positivas:	20
2.3	Solución para energías negativas:	25
2.4	Funciones de onda propias para energías positivas y negativas .	26
3	Efectos de la aplicación de un campo uniforme.	35
3.1	Espectro de energías	35
3.2	Funciones de onda propias	43
4	Conclusiones	53

0.1 Introducción

Actualmente es común diseñar y preparar multicapas semiconductoras, haciéndolo capa por capa atómica, con un estricto control en el envenenamiento por impurezas (dopaje) y composición llegando a construir prácticamente cada capa atómica una por una. También las multicapas pueden ser diseñadas de manera que el tamaño de éstas conste de unas cuantas capas atómicas (Ver referencia[1]). Dichas estructuras pueden generar dispositivos ópticos y optoelectrónicos que ofrezcan un funcionamiento muy eficiente y motivar la investigación de nuevas e interesantes áreas en la física del estado sólido y la mecánica cuántica.

En otras palabras, además del entendimiento de la física básica asociada al estudio de propiedades electrónicas y ópticas de las nanoestructuras semiconductoras tales como pozos, alambres y puntos cuánticos, existe también interés en estas estructuras debido a su importancia tecnológica.

En esta tesis estudiaremos un sistema que consiste de un pozo de paredes infinitas en cuyo interior se halla un potencial puntual. Este sistema puede modelar estructuras semiconductores heterogéneas que representan regiones en donde se alternan materiales semiconductores con propiedades dieléctricas que son muy contrastantes, es decir que se tenga un material con una constante dieléctrica muy baja o bien el vacío, y en medio de éste otro material insertado con una constante dieléctrica mayor. Por otro lado, el potencial atractivo muy localizado representa una capa muy delgada insertada en el pozo de cierto material semiconductor con constante dieléctrica muy grande. En una segunda etapa tomaremos en cuenta también la presencia de un campo eléctrico uniforme que actúa adicionalmente sobre una partícula cargada confinada en este pozo. Cabe mencionar que nuestro modelo unidimensional puede también proveer las características generales cualitativas del confinamiento de un

protón en un núcleo, en donde el pozo de potencial representa al potencial del núcleo y la delta a otra partícula más masiva que se encuentra también bajo la atracción del potencial del núcleo, la cual atrae a la primera partícula, es decir al protón.

A continuación se presenta la estructura de esta tesis.

En el primer capítulo se hace una breve revisión de algunos confinamientos cuánticos como el de una partícula en un pozo de potencial de paredes infinitas, el cual representa el caso más sencillo de confinamiento de una partícula. También se revisa el comportamiento de una partícula bajo la acción de un potencial delta atractivo. Para este caso se presentan dos procedimientos para obtener la solución del sistema: uno aplicando condiciones de frontera a las soluciones generales de la ecuación diferencial de Schrödinger, y otro resolviendo la misma ecuación de Schrödinger, pero en su forma integral. Por último, en este capítulo se analizan las soluciones de la ecuación de Schrödinger cuyo potencial contiene un campo uniforme. Revisamos la soluciones de estos tres sistemas ya que constituyen elementos parciales del modelo que estudiaremos en este trabajo.

En el segundo capítulo se desarrolla la solución del primer problema, que es el de un caso de confinamiento por un pozo y una fuerza puntual, se presenta la solución de la ecuación de Schrödinger mediante el método convencional de condiciones de frontera, así como las gráficas de las funciones propias de este sistema, además se hace un énfasis en la peculiaridad de que se tienen soluciones tan solo para ciertos valores umbrales de la intensidad de la delta. En el siguiente capítulo se presenta la solución al segundo problema que es en el que se considera la presencia de un campo eléctrico uniforme, y todo su desarrollo es completamente análogo al capítulo anterior.

Finalmente en el último capítulo se presentan las conclusiones de los resultados obtenidos en los dos capítulos anteriores.

Capítulo 1

Confinamientos cuánticos simples

En este capítulo revisaremos tres sistemas cuánticos en donde se aprecian independientemente los elementos y las características del modelo que estudiaremos en este trabajo, que plantearemos y resolveremos en los capítulos siguientes.

Los confinamientos que abordaremos aquí son el pozo de paredes infinitas, el potencial delta de Dirac atractivo y el potencial asociado a un campo uniforme.

1.1 Partícula en un pozo infinito de potencial

Consideremos el caso de una partícula confinada en una caja de paredes infinitas, la cual sólo puede moverse en la región $x = 0$ y $x = a$, lo cual se representa en la figura (1.1)

Esto lo podemos expresar mediante el potencial siguiente

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \quad x \geq a \\ 0, & 0 < x < a \end{cases}, \quad (1.1)$$

y la ecuación de Schrödinger queda como sigue:

$$\begin{aligned} \hat{E}\Psi &= \hat{H}\Psi \\ E\Psi &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi + V(x)\Psi. \end{aligned} \quad (1.2)$$

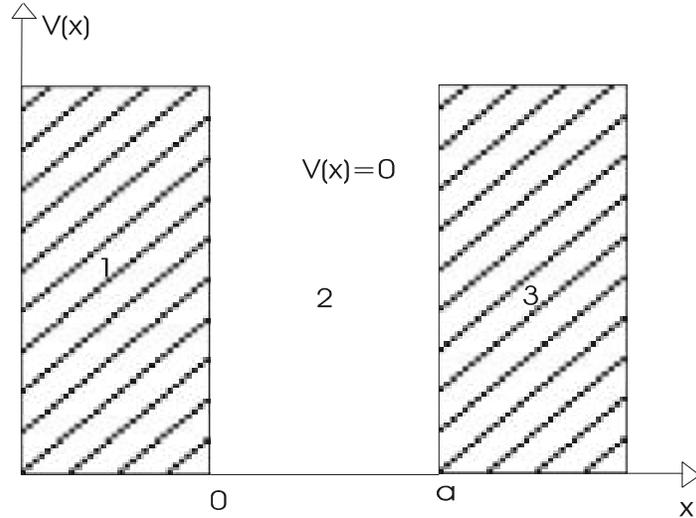


Figura ~ 1.1:

Pero si dividimos el espacio en tres regiones 1, 2 y 3 como se muestra en la figura (1.1), notamos que es necesario que en las regiones 2 y 3 la función de onda sea nula, ésto debido al valor infinito de la energía en dichas regiones.

Por el contrario en la región 2 tenemos la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$E\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi, \quad (1.3)$$

la cual notamos que es una ecuación diferencial ordinaria de segundo grado, y en donde si hacemos el cambio de variable

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (1.4)$$

vemos que su solución general está dada por:

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad (1.5)$$

pero al imponer las condiciones de frontera

$$\Psi(0) = 0, \quad (1.6)$$

$$\Psi(a) = 0,$$

obtenemos que la constante B debe ser igual a cero por lo tanto, se concluye que

$$A \operatorname{sen} ka = 0, \quad (1.7)$$

de la cual es fácil determinar que

$$ka = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.8)$$

Pero como k está relacionada con la energía por la ecuación (1.4), entonces podemos concluir que las energías están cuantizadas en múltiplos enteros, y son las siguientes. (Ver figura (1.2))

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Tan solo falta ahora encontrar el valor de la constante A en la función de onda, lo cual lo hacemos mediante la condición de normalización:

$$\begin{aligned} \int_0^a \Psi(x)^2 dx &= A^2 \int_0^a \operatorname{sen}^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx = 1 & (1.9) \\ 1 &= \frac{A^2 a}{n\pi} \int_0^{n\pi} \operatorname{sen}^2 \theta d\theta = \frac{A^2 a}{2} \\ A &= \sqrt{\frac{2}{a}}, \end{aligned}$$

por lo tanto la función de onda queda determinada de la siguiente manera:

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left(\frac{n\pi x}{a} \right). \quad (1.10)$$

Si graficamos la función de onda para diferentes estados ($n = 1, 2, 3, \dots$) obtenemos el comportamiento presentado en la figura (1.2), en la cual podemos observar que para el estado base $n = 1$ la función de onda no presenta ningún nodo, para el primer estado excitado $n = 2$ se tiene un nodo en el centro del pozo, y para el segundo estado excitado, $n = 3$ se tienen dos nodos, por lo cual se puede concluir que el número de nodos que presenta la función de onda es igual al número n del estado cuántico menos uno, es decir $n - 1$, siendo este

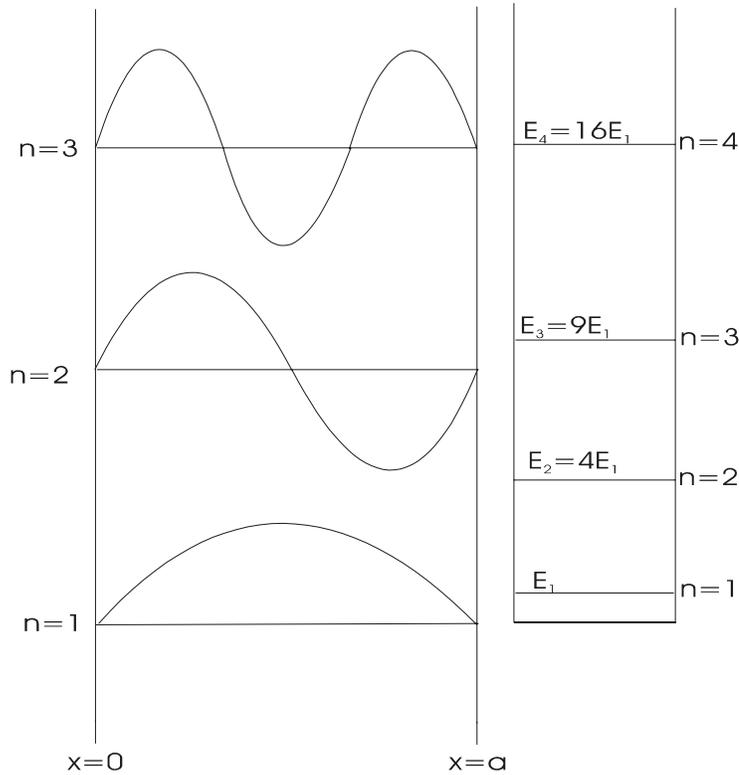


Figura ~ 1.2:

un comportamiento que se conserva para todos los estados siguientes. Cabe mencionar que este problema es el caso límite cuando el potencial $V(x)$ tiende a infinito, de otro problema conocido como el pozo rectangular.

1.2 Potencial puntual atractivo

Si tenemos el caso en el que un potencial estuviera descrito de la siguiente manera: $V(x) = -A\delta(x)$, $a > 0$, en donde $\delta(x)$ es la función Delta de Dirac (Ver referencia [3]), entonces la ecuación de Schrödinger correspondiente a este caso,

queda de la siguiente manera:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} [E\Psi(x) - V(x)\Psi(x)] \quad (1.11)$$

donde el potencial se vuelve infinito si $x = 0$, y para el caso en que $x \neq 0$ la ecuación queda como sigue

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi = -\frac{2m}{\hbar^2} E\Psi(x), \quad x \neq 0 \quad (1.12)$$

donde si la resolvemos para el caso de estados ligados, es decir estados en los que la energía es tal que $E = -|E|$, la solución a la ecuación de Schrödinger (1.11) será la siguiente:

$$\Psi(x) = e^{-\kappa|x|}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}. \quad (1.13)$$

Pero en la posición $x = 0$ la función de onda debe de ser continua, para lo cual integramos la ecuación (1.11), desde $0 - \epsilon$ hasta $0 + \epsilon$:

$$\left. \frac{d}{dx} \Psi \right|_{0+\epsilon} - \left. \frac{d}{dx} \Psi \right|_{0-\epsilon} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_{0-\epsilon}^{0+\epsilon} [-V(x) + E] \Psi(x) dx,$$

y considerando que $\epsilon \rightarrow 0$ obtenemos lo siguiente:

$$\frac{d}{dx} \Psi(0^+) - \frac{d}{dx} \Psi(0^-) = -\frac{2mA}{\hbar^2} \Psi(0), \quad (1.14)$$

en donde si sustituimos la ecuación (1.13) y pedimos que la función de onda sea continua en el mismo punto

$$\Psi(0^+) = \Psi(0^-), \quad (1.15)$$

obtenemos la siguiente expresión para la energía:

$$\kappa = \frac{mA}{\hbar^2} \Rightarrow E = -\frac{mA^2}{2\hbar^2}, \quad (1.16)$$

Siendo ésta la energía del único estado ligado de este potencial, que de hecho es negativa.

A continuación encontramos las funciones de onda propias correspondientes a las energías propias positivas, utilizando dos formalismos equivalentes: En el primero se aplican condiciones de frontera a las soluciones generales de la ecuación diferencial, y en el segundo se calcula directamente la solución a partir de la ecuación integral.

1.2.1 Método convencional

Comenzamos con el primer procedimiento, para lo cual queremos resolver la ecuación (1.11), pero al potencial delta lo tomaremos en cuenta a través de la condición de frontera válida en la interface de dos regiones 1 y 2 con potencial nulo. Es decir, la ecuación que resolveremos en ambas regiones es

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) = -k^2\Psi(x), \quad (1.17)$$

dicha situación se representa en la figura (1.3).

Se proponen soluciones para las regiones 1 y 2, para la región 1 se considera la onda incidente y la reflejada, y para la región 2, sólo se tiene el término de transmisión, lo cual se representa como sigue:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= ae^{ikx} + re^{-ikx}, \\ \Psi_2(x) &= te^{ikx}, \end{aligned} \quad (1.18)$$

cuyas derivadas son las siguientes:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\Psi_1(x) &= ikae^{ikx} - ikr e^{-ikx} \\ \frac{d}{dx}\Psi_2(x) &= ikte^{ikx} \end{aligned} \quad (1.19)$$

Ahora se deben aplicar las condiciones de frontera del sistema, que son la continuidad de la función de onda en la posición del potencial delta, y la discontinuidad en la derivada de la misma. Por ende, si sustituimos las funciones de onda y sus derivadas que están dadas por las ecuaciones (1.18 y 1.19) en

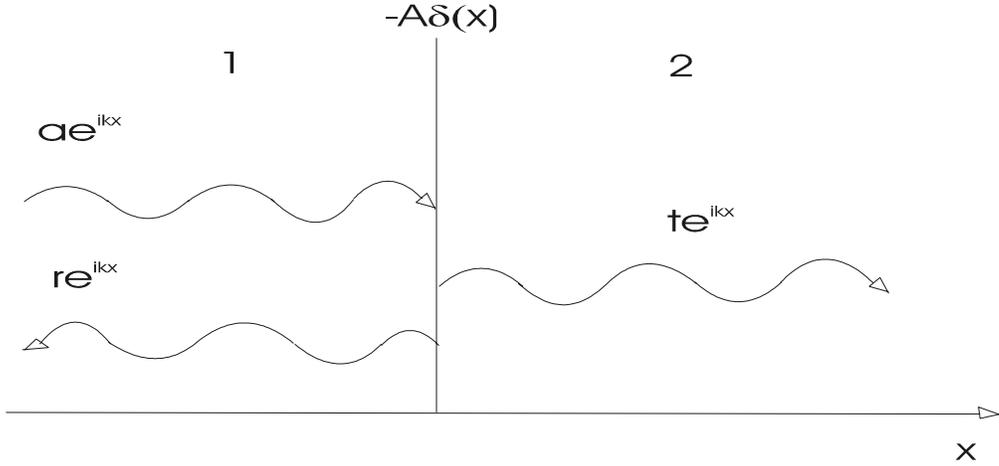


Figura ~1.3:

las condiciones de frontera que son las ecuaciones (1.14 y 1.15), tenemos el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} a + r &= t, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} (ikt - ika + ikr) - A(a + r) &= 0, \end{aligned} \quad (1.20)$$

el cual si lo reescribimos en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -A - \tau & -\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ t \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} -1 \\ A - \tau \end{pmatrix}, \quad (1.21)$$

donde $\tau = \frac{i\hbar^2 k}{2m}$. Este sistema lo podemos resolver para las constantes r y t , las cuales son las siguientes

$$r = -\frac{aA}{2\tau + A}, t = \frac{2a\tau}{2\tau + A}. \quad (1.22)$$

Finalmente podemos escribir las funciones de onda del sistema como

$$\Psi_1(x) = ae^{ikx} - \frac{aA}{2\tau + A} e^{-ikx}, \quad (1.23)$$

$$\Psi_2(x) = \frac{2a\tau}{2\tau + A} e^{ikx}.$$

1.2.2 Método Integral

Para utilizar ahora el segundo formalismo, tomamos la ecuación de Schrödinger (1.11), que podemos escribir por conveniencia de la siguiente manera:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \Psi(x) = U(x)\Psi(x), \quad (1.24)$$

donde $U(x) = \frac{2m}{\hbar^2} V(x)$. Esta ecuación la podemos resolver, y su solución general estaría dada por la solución para el caso en el que no se tiene un término no homogéneo ($\varphi(x)$), es decir si $U(x) = 0$, más la solución para el caso en que $U(x) \neq 0$, notemos que $\varphi(x)$ corresponde a la solución para una una partícula libre, es decir la solución a la la siguiente ecuación

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \varphi(x) = 0, \quad (1.25)$$

la cual sería:

$$\varphi(x) = ae^{ikx}. \quad (1.26)$$

Esta solución representa a una parte de la función de onda incidente, entonces podemos reescribir la ecuación de Schrödinger (1.24) como sigue

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \Psi(x) = U(x)e^{ikx}, \quad (1.27)$$

de la cual el lado derecho de la ecuación es el término no homogéneo o “fuente” de la ecuación diferencial, por lo cual su solución general está dada de la siguiente forma

$$\Psi(x) = \varphi(x) - \int G(x-x') U(x') \Psi(x') dx', \quad (1.28)$$

donde $G(x-x')$ es una función de Green. En este punto es conveniente hacer una digresión para calcular la función de Green definida por la ecuación

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) G(x-x') = \delta(x-x'). \quad (1.29)$$

En la ecuación (1.27) el operador diferencial $\frac{d^2}{dx^2}$ genera un conjunto continuo de funciones propias

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dx^2}\Psi_k(x) &= -k^2\Psi_k(x) \\ \Psi_k(x) &= e^{ikx},\end{aligned}\tag{1.30}$$

las cuales forman un conjunto ortonormal, es decir

$$\int \Psi_{k_1}^*(x)\Psi_{k_2}(x)dx = \delta(k_1 - k_2).\tag{1.31}$$

Ahora desarrollamos $\Psi(x_1)$ en las funciones propias como sigue:

$$\Psi(x_1) = \frac{1}{2\pi} \int A_{k_1}\Psi_{k_1}(x_1)dk_1,\tag{1.32}$$

la cual es una integral de Fourier. Sustituyendo la ecuación anterior (1.32) en la ecuación de Schrödinger (1.27) y usando la ecuación (1.31) obtenemos

$$\frac{1}{2\pi} \int A_k (k^2 - k_1^2) \Psi_{k_1}(x) dk_1 = U(x)e^{ikx},\tag{1.33}$$

ahora multiplicamos por $\Psi_{k_2}^*(x)$ e integramos sobre todo el espacio

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi} \int A_k (k^2 - k_1^2) dk_1 \int \Psi_{k_2}^*(x)\Psi_{k_1}(x)dx &= A_{k_2} (k^2 - k_2^2) \\ &= \int \Psi_{k_2}^*(x)U(x)e^{ikx} dx,\end{aligned}\tag{1.34}$$

resolviendo para A_{k_2} y sustituyendo en (1.32)

$$\Psi(x_2) = \frac{1}{2\pi} \int \left[(k^2 - k_2^2)^{-1} \int \Psi_{k_2}^*(x_1)U(x_1)e^{ikx_1} dx_1 \right] \Psi_{k_2}(x_2) dk_2,\tag{1.35}$$

por lo tanto, si sustituimos k_2 por k_1 y x_1 por x_2

$$\Psi(x_1) = \frac{1}{2\pi} \int \Psi_{k_1}(x_1) (k^2 - k_1^2)^{-1} dk_1 \int \Psi_{k_1}^*(x_2)U(x_2)e^{ikx_2} dx_2,\tag{1.36}$$

e invirtiendo el orden de integración

$$\Psi(x_1) = \frac{1}{2\pi} \int G_k(x_1, x_2) U(x_2)e^{ikx_2} dx_2,\tag{1.37}$$

donde $G_k(x_1, x_2)$ es la función de Green, la cual está definida por:

$$G_k(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \int \frac{\Psi_{k_1}^*(x_2)\Psi_{k_1}(x_1)}{k_1^2 - k^2} dk_1. \quad (1.38)$$

Ahora resolvemos esta integral (1.38) usando las funciones propias (1.30)

$$G_k(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik_1(x_1-x_2)}}{k_1^2 - k^2} dk_1, \quad (1.39)$$

de donde notamos que los puntos singulares son $k_1 = \pm k$. Ahora podemos encerrar a dichos puntos en dos curvas cerradas γ_1 y γ_2 en el plano complejo, donde γ_1 es un semicírculo en el semiplano superior y γ_2 es un semicírculo en el semiplano inferior. Es conveniente trasladar a estos puntos en el eje real como sigue: $k \rightarrow k + iu$, para posteriormente tomar el límite: $u \rightarrow 0$, por lo tanto notamos que la trayectoria γ_1 encierra a $k_1 = +(k + iu)$, y la trayectoria γ_2 encierra a $k_1 = -(k + iu)$. Por lo tanto, podemos reescribir la ecuación (1.39) como sigue:

$$G_k(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma_1} \frac{e^{ik_1(x_1-x_2)}}{k_1^2 - k^2} dk_1 + \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma_2} \frac{e^{-ik_1(x_1-x_2)}}{k_1^2 - k^2} dk_1, \quad (1.40)$$

y estas integrales las podemos calcular utilizando el Teorema del Residuo (Ver referencia [4]), por lo que la ecuación (1.40) queda como sigue:

$$G_k(x_1, x_2) = \frac{i}{2\pi} e^{ik|x_1-x_2|}. \quad (1.41)$$

Una vez determinada la función de Green definida por la ecuación (1.29) y retomando la ecuación (1.24), entonces sabemos que su solución está dada por la ecuación (1.28). Al sustituir la función de Green (1.41) así como la solución homogénea dada por la ecuación (1.26) y el potencial $U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x) = -\frac{2mA}{\hbar^2}\delta(x)$ en la ecuación (1.28), obtenemos

$$\Psi(x) = ae^{ikx} + \int \frac{i}{2k} e^{ik|x-x'|} \frac{2mA}{\hbar^2} \delta(x') \Psi(x') dx'. \quad (1.42)$$

Efectuando la integral que resulta inmediata usando las propiedades de la función delta de Dirac (Ver referencia [3]), la función de onda queda como

sigue:

$$\Psi(x) = ae^{ikx} + \frac{i}{2k} \frac{2mA}{\hbar^2} e^{ik|x|} \Psi(0), \quad (1.43)$$

donde si introducimos el cambio de variable $\tau = \frac{i\hbar^2 k}{2m}$ obtenemos la siguiente expresión:

$$\Psi(x) = ae^{ikx} - \frac{A}{2\tau} e^{ik|x|} \Psi(0), \quad (1.44)$$

donde el primer sumando representa a la onda incidente, y el segundo, corresponde a las ondas transmitida y reflejada, dependiendo del signo de la variable que se encuentra dentro del valor absoluto. Ahora si evaluamos la ecuación (1.44) para cuando $x = 0$ entonces obtenemos lo siguiente:

$$\Psi(0) = a - \frac{A}{2\tau} \Psi(0), \quad (1.45)$$

de donde:

$$\Psi(0) = \frac{2\tau a}{2\tau + A}, \quad (1.46)$$

por lo que la ecuación (1.44) queda como sigue:

$$\Psi(x) = ae^{ikx} - \frac{Aa}{2\tau + A} e^{ik|x|}, \quad (1.47)$$

en donde para el caso negativo de la variable x que se encuentra dentro del valor absoluto tenemos la parte de reflexión de las ondas, la que se representa de la siguiente manera:

$$\Psi_1(x) = ae^{ikx} - \frac{Aa}{2\tau + A} e^{-ikx}, \quad (1.48)$$

y para el caso positivo tenemos la parte de transmisión:

$$\Psi(x)_2 = \frac{2\tau a}{2\tau + A} e^{ikx}. \quad (1.49)$$

Si comparamos las ecuaciones (1.48) y (1.49) con (1.23) vemos que son las mismas, es decir llegamos al mismo resultado por un procedimiento alterno.

De las ecuaciones (1.48) y (1.49) podemos tomar los coeficientes

$$r = -\frac{aA}{2\tau + A}, \quad t = \frac{2a\tau}{2\tau + A}, \quad (1.50)$$

donde la constante a es una constante particular del sistema, ya que es la amplitud de la onda incidente, y a partir de las constantes r y t se pueden deducir los coeficientes de reflexión y de transmisión R y T , ya que estos coeficientes se definen como

$$T = \left| \frac{t}{a} \right|^2 \frac{k_2}{k_1}, \quad R = \left| \frac{r}{a} \right|^2, \quad (1.51)$$

donde k_1 y k_2 son los números de onda en la parte incidente y transmitida respectivamente, pero como en este caso los potenciales en ambas partes son el mismo, entonces $k_1 = k_2$, así que sustituyendo los coeficientes (1.50) en las ecuaciones (1.51) obtenemos lo siguiente:

$$T = \frac{4\tau^2}{4\tau^2 + A^2}, \quad R = \frac{A^2}{4\tau^2 + A^2}. \quad (1.52)$$

Estos coeficientes indican que una parte de la onda incidente se refleja en la barrera definida por el potencial y la otra se transmite, y éstos dependen de la intensidad del potencial, A .

1.3 Partícula bajo la acción de un campo eléctrico

En el caso en el que se tiene una partícula que se mueve en un campo eléctrico externo uniforme $V(x) = Fx$ en donde F es una constante que denota la fuerza eléctrica, su comportamiento quedaría descrito por la siguiente ecuación de Schrödinger (Ver referencia[11]):

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E + Fx) \Psi(x) = 0, \quad (1.53)$$

la cual tiene una sola solución para cualquier valor de la energía E . Esta solución decrece exponencialmente, y oscila indefinidamente si $x \rightarrow \infty$, por

lo cual se tiene que el espectro de energías de una partícula en un campo homogéneo es continuo y no degenerado, es decir para cada valor de la energía ($-\infty < E < \infty$) le corresponde una solución y describe un movimiento de la partícula que está limitado en la dirección negativa de x e ilimitado en la dirección positiva. Si ahora introducimos la siguiente variable adimensional

$$y = \left(x + \frac{E}{F}\right) \left(\frac{2mk}{\hbar^2}\right)^{1/3}, \quad (1.54)$$

la ecuación (1.53) se reduce a:

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} \varphi(y) + y\varphi(y) = 0, \quad (1.55)$$

esta ecuación no contiene a la energía como parámetro, pero después de obtener su solución podemos encontrar la eigenfunción correspondiente a cualquier valor de la energía, dicha solución es la siguiente

$$\varphi(y) = N Ai(-y), \quad (1.56)$$

donde Ai es la función de Airy (Ver referencia [5]), y N es una constante de normalización, que al calcularla se obtiene

$$N = \left(2m\pi^{-3/2} F^{-1/2} \hbar^{-2}\right)^{1/3}. \quad (1.57)$$

Finalmente, la función de onda de una partícula con energía E , considerando la solución estacionaria y la dependiente del tiempo es

$$\Psi_E(x, t) = N Ai(-y) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}.$$

Capítulo 2

Partícula en un pozo bajo la acción de un potencial puntual

En este capítulo planteamos y resolvemos un sistema cuántico en el cual la partícula se somete simultáneamente a dos confinamientos: uno extendido en una región finita y otro localizado en un punto. Calcularemos tanto las funciones como las energías propias para energías positivas y negativas.

2.1 Confinamiento por un pozo y un potencial puntual

Consideremos una partícula confinada en una caja unidimensional de paredes infinitas separadas una distancia b sobre la cual actúa una fuerza muy localizada representada por una delta de Dirac $V(x) = A\delta(x - a)$. La partícula así confinada está descrita por la ecuación de Schrödinger siguiente

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi + V(x)\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

$$\text{con :} \quad (2.2)$$

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{l} -A\delta(x - a), \quad 0 < x < b \\ \infty, \quad x < 0, \quad x > b \end{array} \right\} \quad (2.3)$$

en donde m es la masa de la partícula, a la posición de la delta, E la energía, x la variable de posición y Ψ la función de onda.

Para resolver este problema dividimos el espacio accesible a la partícula: $0 < x < b$, en dos regiones que denotamos por 1 y 2, delimitadas por la posición de la delta, ésto es $0 \leq x < a$ y $a < x \leq b$. Nótese que en ambas regiones la ecuación de Schrödinger se reduce a la de una partícula en una caja de paredes infinitas, que como se mostró en la sección (1.1), sus energías propias son sólo positivas sin embargo, en este caso la presencia de un potencial atractivo $V(x)$ sugiere que las energías propias podrían llegar a ser negativas, por esta razón consideraremos ambos casos por separado.

2.2 Solución para energías positivas:

La solución general de la ecuación de Schrödinger (2.1) para el caso $E > 0$ está dada por:

$$\Psi_1(x) = c \cos(kx) + d \operatorname{sen}(kx), \quad 0 < x < a \quad (2.4)$$

$$\Psi_2(x) = f \cos(kx) + g \operatorname{sen}(kx), \quad a < x < b \quad (2.5)$$

en donde c, d, f, g son constantes arbitrarias determinadas por las condiciones de frontera que discutiremos a continuación. Siguiendo un procedimiento similar al utilizado en la sección (1.2) obtenemos las siguientes condiciones de frontera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dx} \Psi_2(a) - \frac{d}{dx} \Psi_1(a) \right) - A \Psi_1(a) = 0, \quad (2.6)$$

$$\Psi_1(a) - \Psi_2(a) = 0, \quad (2.7)$$

que son la condición de discontinuidad de la derivada de Ψ debida a la presencia del potencial delta y la condición de continuidad de Ψ respectivamente, donde esta última garantiza la continuidad de la densidad de probabilidad. Dado que el potencial es infinito fuera del pozo, Ψ se debe anular en los extremos de éste,

es decir:

$$\Psi_1(0) = 0, \quad (2.8)$$

$$\Psi_2(b) = 0. \quad (2.9)$$

Las cuatro últimas condiciones se utilizan para encontrar las constantes particulares de nuestro problema, las cuales dan lugar al sistema de ecuaciones siguiente

$$0 = -\frac{\hbar^2}{2m} (gk \cos(ka) - f k \operatorname{sen}(ka) - dk \cos(ka) + ck \operatorname{sen}(ka)) \quad (2.10)$$

$$-Ac \cos(ka) - A d \operatorname{sen}(ka)$$

$$c \cos(ka) + d \operatorname{sen}(ka) - f \cos(ka) - g \operatorname{sen}(ka) = 0 \quad (2.11)$$

$$c \cos(k(0)) + d \operatorname{sen}(k(0)) = 0 \quad (2.12)$$

$$f \cos(kb) + g \operatorname{sen}(kb) = 0, \quad (2.13)$$

el cual se puede escribir en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} \frac{-\gamma\chi}{b} & \frac{k\chi}{b} & k\sqrt{1-\chi^2} & k\chi \\ -k\sqrt{1-\chi^2} & -\frac{\gamma\sqrt{1-\chi^2}}{b} & -\chi & -\sqrt{1-\chi^2} \\ \chi & \sqrt{1-\chi^2} & -\chi & -\sqrt{1-\chi^2} \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(kb) & \operatorname{sen}(kb) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \\ f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

donde hemos introducido las siguientes variables: $u = kb$, $\alpha = \frac{a}{b}$, $\frac{1}{\gamma} = \frac{\hbar^2}{Abm}$ y $\chi = \cos(ka)$.

Nótese que este sistema de cuatro ecuaciones es lineal y homogéneo para las constantes c, d, f y g . Por lo tanto, la única manera de que tenga una solución no trivial es que el determinante del sistema sea nulo. En consecuencia basta con usar solo tres de las cuatro ecuaciones para resolverlo y determinar posteriormente la constante faltante por medio de la condición de normalización para la densidad de probabilidad. Resolviendo un sistema de tres ecuaciones

en el que excluimos la ecuación correspondiente a la condición de discontinuidad en la derivada de la delta de Dirac que es la ecuación (2.6) y expresando c , d y f en términos de la constante g , se obtiene

$$d = g - g \cot [ak] \tan [bk], \quad (2.15)$$

$$c = 0. \quad (2.16)$$

$$f = -g \tan [bk]. \quad (2.17)$$

La condición de normalización, que garantiza que la probabilidad de encontrar a la partícula en todo el espacio es uno, y está dada por:

$$\int_0^a \Psi_1^2(x) dx + \int_a^b \Psi_2^2(x) dx = 1, \quad (2.18)$$

la cual nos proporciona el valor de g

$$g = \sqrt{\frac{-4k}{\sec^2 [bk] (\mu + \sin(-\mu)) + (-\eta + \sin\eta) \left(\cot \left[\frac{\eta}{2}\right] \tan [bk] - 1\right)^2}}, \quad (2.19)$$

donde $\mu = 2k(a - b)$ y $\eta = 2ak$.

De esta manera la función de onda queda como sigue

$$\Psi_1 = (g - g \cot [ak] \tan [bk]) \operatorname{sen} kx, \quad (2.20)$$

$$\Psi_2 = -g \sec [bk] \operatorname{sen}[k(b - x)]. \quad (2.21)$$

Como se comentó antes, para que exista una solución distinta de cero del sistema lineal homogéneo, dado por la ecuación(2.14), es necesario que la matriz del sistema sea singular lo cual es equivalente a pedir que el determinante de ésta sea cero, es decir:

$$h(u) = -u \operatorname{sen}(u) + \gamma \operatorname{sen}(u\alpha) \operatorname{sen}(u - u\alpha) = 0. \quad (2.22)$$

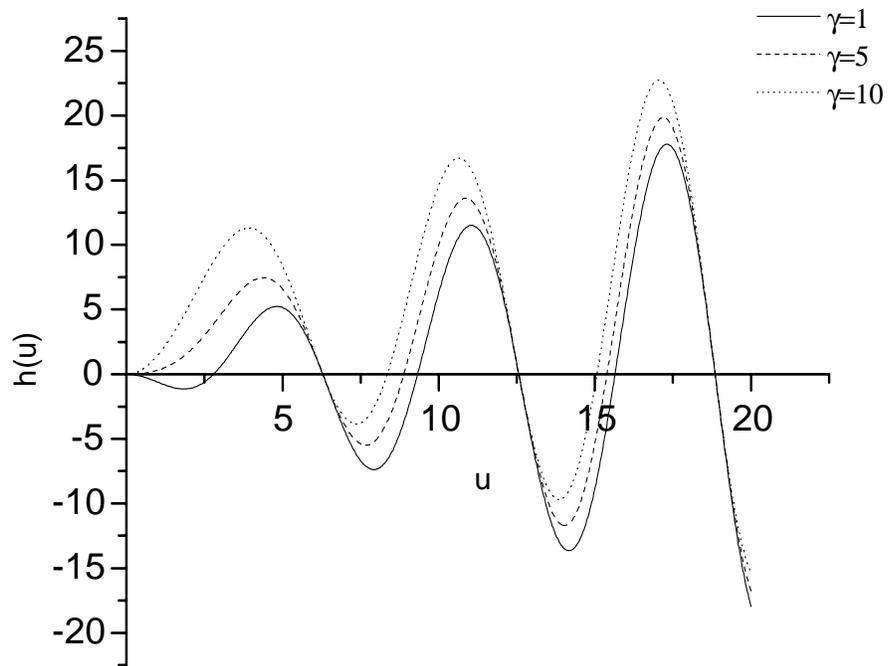
Notamos que ésta es una ecuación trascendente para u y a partir de sus raíces se pueden obtener las energías propias de los estados permitidos mediante la siguiente relación:

$$u = \frac{2Em}{\hbar^2}, \quad (2.23)$$

siempre que $E > 0$.

La gráfica de la ecuación trascendente (2.22) se muestra en la figura (2.1) para diferentes valores de γ que son proporcionales a la intensidad de la delta, la cual tiene una posición de $\alpha = 0.5$, y en ella podemos apreciar las raíces de la misma.

Notamos que para $\gamma = 1$ tenemos una raíz más que para los otros valores, ésto se debe a que, como veremos en la siguiente sección, para el caso de energías negativas, tan sólo se tiene una función de onda para intensidades mayores que $\gamma = 2$. Es decir, para las curvas con intensidades de 5 y 10, el estado base lo encontramos en el espectro negativo de energías, es por eso que tienen una raíz menos en el espectro positivo, y por el contrario, en el caso de la intensidad igual a uno la raíz correspondiente a la energía del estado base, se encuentra dentro del espectro positivo. También se debe notar que para todas las curvas, las raíces correspondientes a los estados impares son las mismas para cualquier valor de γ . Esto es razonable, debido a que la delta se encuentra en el centro del pozo, y coincide siempre por tanto con un nodo de un estado impar. En consecuencia la delta no influye sobre la función de onda que se reduce entonces a la correspondiente a una caja con paredes infinitas (Véase sección (1.1)). El mismo comportamiento se debe de esperar cuando la delta se sitúe en un valor racional y la función de onda se encuentre en un estado tal que uno de sus nodos esté en la misma posición que la delta.



Figura~2.1: Solución gráfica de la ecuación trascendente (2.22), donde las soluciones para $\gamma = 1$ son: $u_1 = 2.786$, $u_2 = 6.283$, $u_3 = 9.318$, $u_4 = 12.566$, $u_5 = 15.0644$, etc. Para $\gamma = 5$, las raíces correspondiente a estados pares son: $u_3 = 8.876$, $u_5 = 15.386$, $u_7 = 21.762$, etc. Finalmente para $\gamma = 10$, las raíces de estados pares son: $u_3 = 8.283$, $u_5 = 15.067$, $u_7 = 21.535$, etc.

2.3 Solución para energías negativas:

Para el caso de energías negativas u es imaginario, por lo que resulta útil introducir la variable $\bar{u} \equiv iu$. De manera análoga a la solución general de la ecuación de Schrödinger la solución está dada por:

$$\Psi_1(x) = ce^{kx} + de^{-kx}, \quad (2.24)$$

$$\Psi_2(x) = fe^{kx} + ge^{-kx}. \quad (2.25)$$

Siguiendo un procedimiento similar al usado para energías positivas, obtenemos así las siguientes funciones de onda propias del sistema:

$$\Psi_1(x) = \frac{e^{-2\bar{u}}}{e^{2\bar{u}\alpha} - 1} \left[(e^{2\bar{u}} - e^{2\bar{u}\alpha}) e^{y\bar{u}} + (-e^{2\bar{u}} + e^{2\bar{u}\alpha}) e^{-y\bar{u}} \right] \quad (2.26)$$

$$\Psi_2(x) = -e^{-2\bar{u}} e^{y\bar{u}} + e^{-y\bar{u}}. \quad (2.27)$$

Así mismo, obtenemos la ecuación trascendente la cual queda como:

$$h(\bar{u}) = \cosh(\bar{u} - 2\bar{u}\alpha) + \frac{\bar{u} \operatorname{senh} \bar{u}}{\gamma} - \cosh \bar{u} = 0. \quad (2.28)$$

Nótese que $\bar{u} = 0$ es una solución de esta ecuación, sin embargo esta solución conduce a un valor nulo de k , que a su vez resulta en una función de onda nula. Es decir, dicha raíz es irrelevante. En la figura (2.2) se muestran varias curvas de $h(\bar{u})$ para distintos valores de γ . Se puede ver que existen raíces distintas de cero sólo para valores de γ mayores a 2. Es decir, que existe un valor crítico de γ para el cual hay un estado de energía diferente de cero. Recordemos que el valor de γ está directamente relacionado con la intensidad de la delta, por lo cual podemos decir que a partir de un cierto valor de la intensidad de la delta tendremos un estado de energía negativa, y que la energía de dicho estado disminuye a medida que aumenta la intensidad de la delta. El valor umbral de γ a partir del cual existen soluciones de \bar{u} distintas de cero debe ser pequeño,

por lo que lo podemos estimar analíticamente desarrollando $h(\bar{u})$ en serie de Taylor hasta cuarto orden en \bar{u} :

$$\bar{u}^4 \left(-\frac{1}{24} + \frac{1}{24} (1 - 2\alpha)^4 + \frac{1}{6\gamma} \right) + \bar{u}^2 \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{2} (1 - 2\alpha)^2 + \frac{1}{\gamma} \right) = 0. \quad (2.29)$$

Esto permite encontrar las soluciones aproximadas diferentes de cero siguientes

$$\bar{u} = \frac{\pm \sqrt{6} \sqrt{2\alpha - 2\alpha^2 - \frac{1}{\gamma}}}{\sqrt{-2\alpha + 6\alpha^2 - 8\alpha^3 + 4\alpha^4 + \frac{1}{\gamma}}}, \quad (2.30)$$

en donde el signo es irrelevante, pues ambos nos refieren al mismo estado de energía, dichas soluciones serán reales siempre que $2\alpha - 2\alpha^2 - \frac{1}{\gamma} \geq 0$, por lo que se impone un límite inferior cuando se cumple la igualdad. No es posible obtener esta condición del denominador, pues si éste se hace cero entonces el cociente tiende a infinito. De dicha condición se obtiene el límite inferior $\gamma_u = 2$ para cuando $\alpha = 0.5$ ya que la ecuación.(2.30) es una aproximación para valores pequeños de \bar{u} . En el caso general el valor umbral está dado por la condición:

$$\gamma_u = \frac{1}{2\alpha(1 - \alpha)}. \quad (2.31)$$

Nótese cómo el valor del umbral diverge en ambos costados del pozo, ya que aún colocando la delta en dichos puntos sería imposible tener estados de energía negativa y que la expresión es simétrica respecto al centro del pozo.

2.4 Funciones de onda propias para energías positivas y negativas

Primero analizamos los estados base para tres diferentes intensidades, a partir de las raíces que se obtienen de la ecuación trascendente, para cada una de las intensidades. Para $\gamma = 1$ se grafican las funciones de onda que corresponden al caso de energías positivas, que son las ecuaciones (2.20 y 2.21); y para los

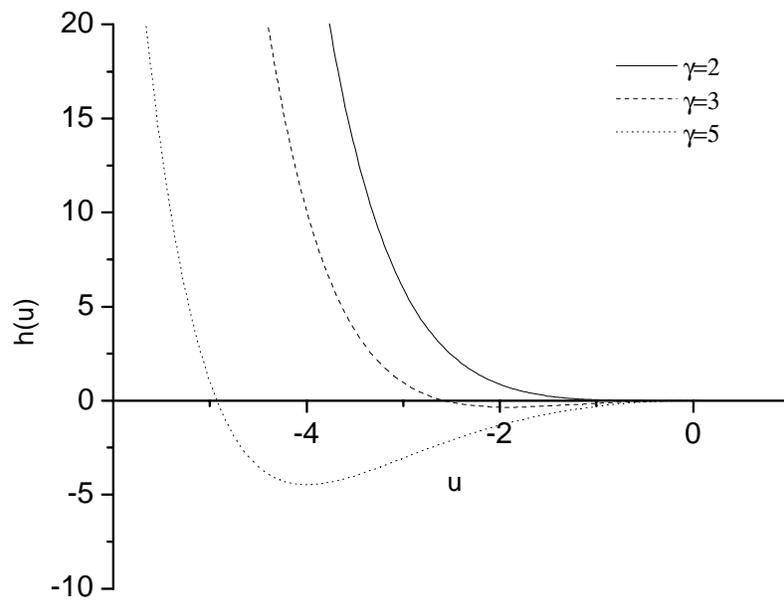


Figura 2.2: Solución gráfica de la ecuación (2.28), donde para $\gamma = 2$ tan solo cruza el eje u por el cero. Para $\gamma = 3$ se tiene una raíz que es $u_1 = -2.576$, y finalmente para $\gamma = 5$ su raíz es: $u_1 = 0.4928$

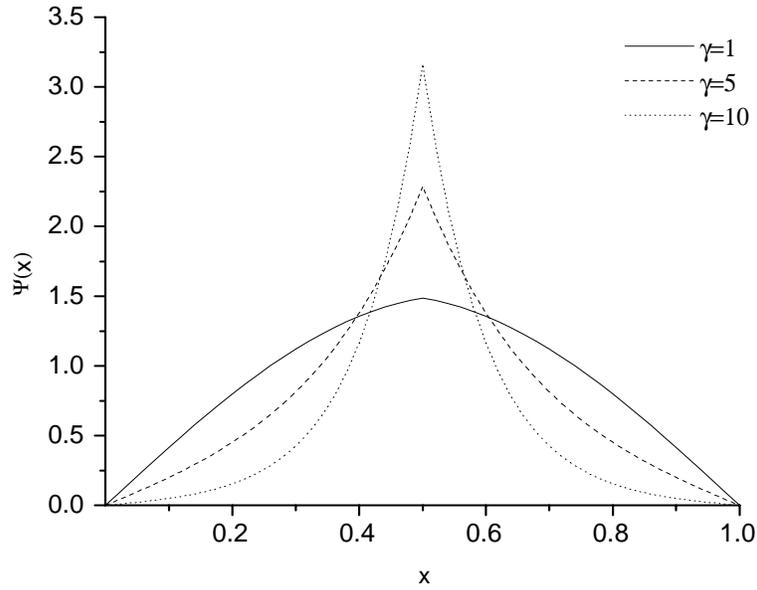


Figura ~2.3: Estado base para diferentes valores de γ

casos donde la intensidad es mayor a uno, se grafican las funciones de onda que corresponden al caso de energías negativas, las ecuaciones (2.26 y 2.27), debido a lo comentado anteriormente, las cuales se muestran en la figura (2.3).

En dicha figura se observa que en las tres gráficas es notable la presencia de la delta, y mas aún, a medida que la intensidad aumenta el pico de la curva se hace más pronunciado, así mismo notamos que las curvas que corresponden a valores de la intensidad γ mayores al valor umbral ($\gamma = 5$ y $\gamma = 10$) cambian el signo de su concavidad con respecto a la curva en la que la intensidad de la delta es menor al valor umbra ($\gamma = 1$).

Ahora analicemos el caso de los segundos estados excitados para las mismas intensidades que para la gráfica anterior, recordando que estos estados corresponden a la primera raíz que no coincide en la gráfica de la ecuación trascendente (2.22). Dichas soluciones se encuentran en la figura (2.4).

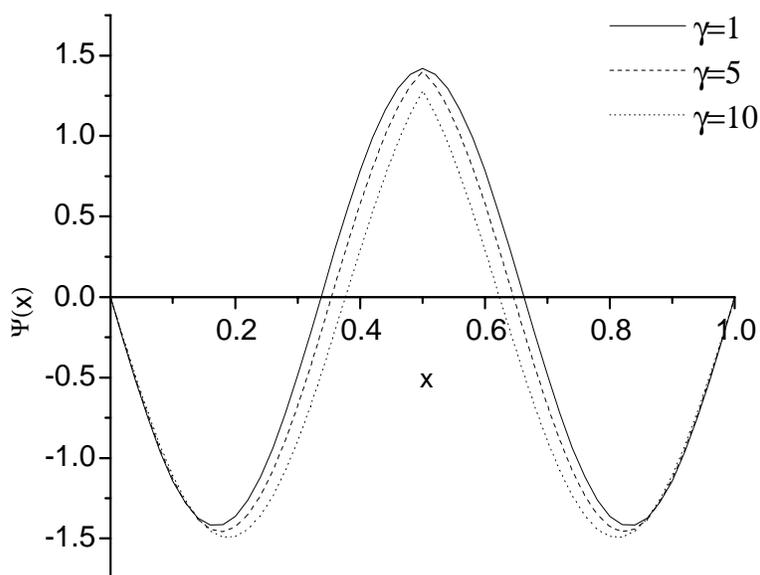


Figura 2.4: Segundo estado excitado

En estas gráficas vemos que todas las curvas tienen dos nodos, lo cual coincide con el caso del segundo estado excitado en un pozo de potencial de paredes infinitas, pero difiere en el punto central que tiene una discontinuidad en su derivada, la cual es una manifestación de la presencia de la delta.

Por último, analizamos uno de los casos de los estados impares, el del primer estado excitado, en el cual, como ya habíamos notado, las raíces de la ecuación trascendente es la misma para todas las intensidades, y es aquí donde la función de onda se reduce a la del caso de un pozo infinito de potencial (véase la sección (1.1)), que es la siguiente:

$$\Psi(x) = c \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{b}\right),$$

donde n indica el estado, b es el ancho del pozo y c es la constante de normalización; pero en este caso $\frac{n\pi x}{b}$ es igual, numéricamente, a la raíz para el primer estado excitado, que en este caso es $\frac{n\pi x}{b} = 6.283$. Por lo tanto, en este caso la

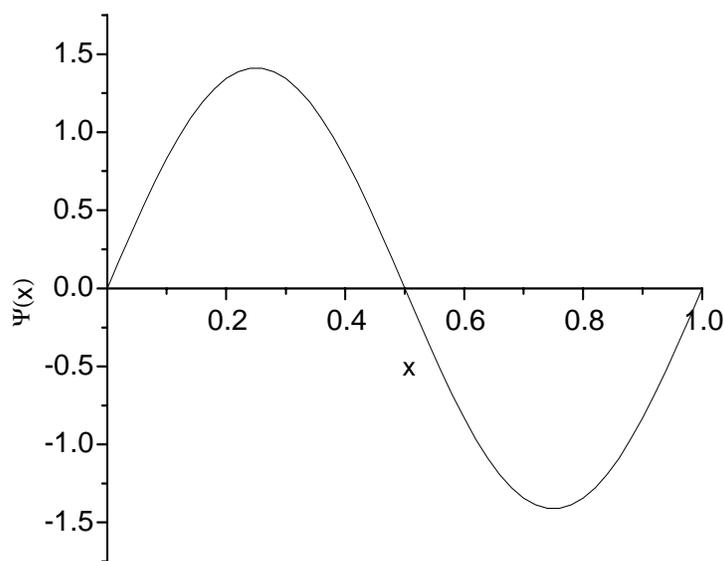


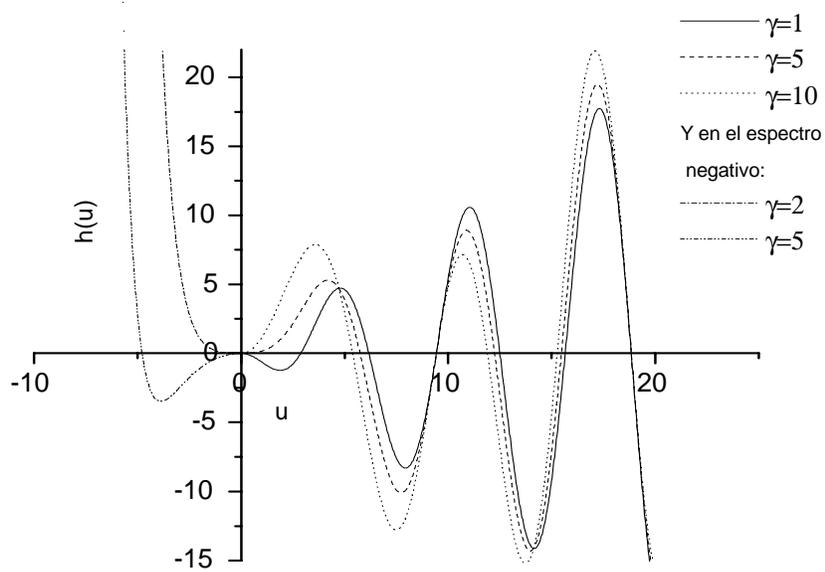
Figura 2.5: Primer estado excitado para cualquier intensidad γ .

gráfica de la función de onda normalizada para cualquier intensidad está dada por la figura (2.5)

Consideremos un valor distinto de α , que es el parámetro de la posición de la delta, al colocarla en el primer tercio del pozo, es decir, $\alpha = \frac{1}{3}$. Las energías propias se muestran gráficamente en la figura (2.6) como las intersecciones con el eje x .

En este caso, es notable una vez más que las raíces impares coinciden para todas las intensidades. Sin embargo, esto no ocurre para las raíces pares, sino que en este caso coinciden las de los estados que son múltiplos de tres, como lo son los estados segundo y quinto excitados, que son los que se presentan en la gráfica (2.6). Por esta razón es notorio que los casos donde el comportamiento de la función de onda se reduce a la del pozo de potencial, depende de la posición de la delta.

En la gráfica (2.7) mostramos las funciones de onda para el estado base.



Figura~2.6: Solución gráfica de las ecuaciones trascendentes para energías negativas y positivas para las intensidades de: $\gamma = 1$ cuyas raíces son : $u_1 = 6.164, u_2 = 9.425$, etc. Para $\gamma = 5$: $u_1 = 5.737, u_2 = 9.427$, etc. Para $\gamma = 10$: $u_1 = 5.381, u_2 = 9.427$, etc. Y en el espectro negativo para $\gamma = 2$,cuya única raíz es cero y para $\gamma = 5$ se tiene la raíz $u = -4.786$.

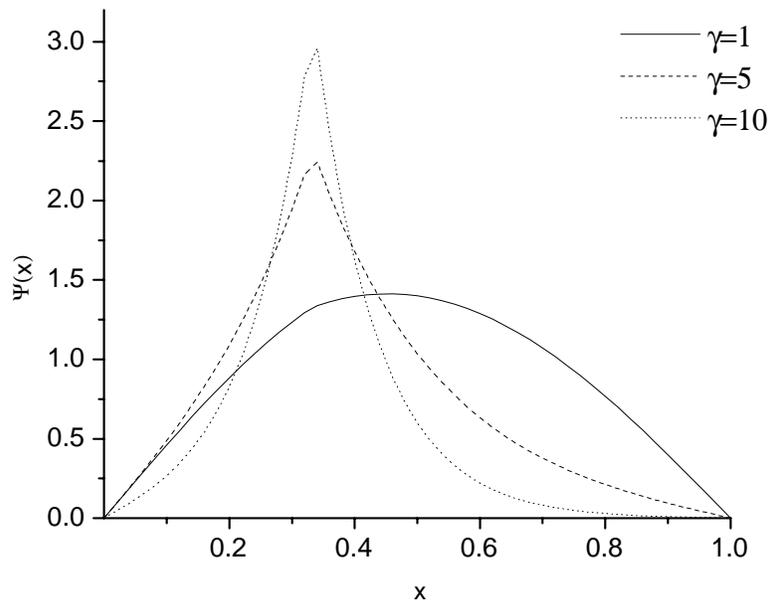


Figura 2.7: Estado base para diferentes intensidad en el caso de $\alpha = \frac{1}{3}$

En este caso, se puede apreciar una vez más que no se tienen nodos, que es lo que habría de esperarse en el caso del estado base, y ahora también es notable la presencia de la delta, de la misma manera que en el caso anterior, solo que ahora ésta se manifiesta en el primer tercio del pozo, como debe de esperarse.

En la figura (2.8) graficamos las funciones de onda para el primer estado excitado.

En estas gráficas podemos apreciar que se sigue manteniendo un comportamiento similar al del pozo de paredes infinitas, sólo que con la presencia de la delta en el primer tercio. Cabe mencionar que tanto en este caso como en el anterior, el efecto de la delta en la energía del estado base es más notoria que en los estados excitados, aunque se sigue manifestando.

En la figura (2.9) se presenta la gráfica de la función de onda para el

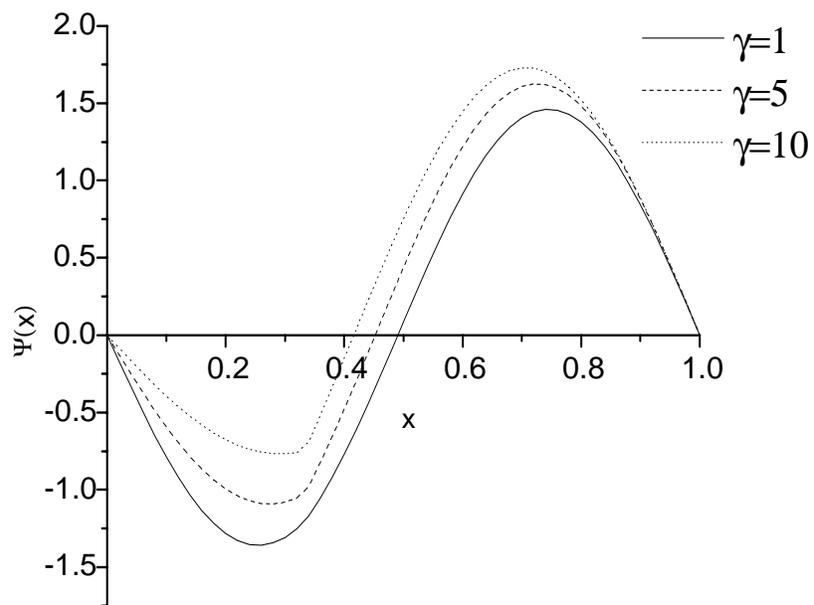


Figura ~ 2.8: Primer estado excitado para diferentes intensidades

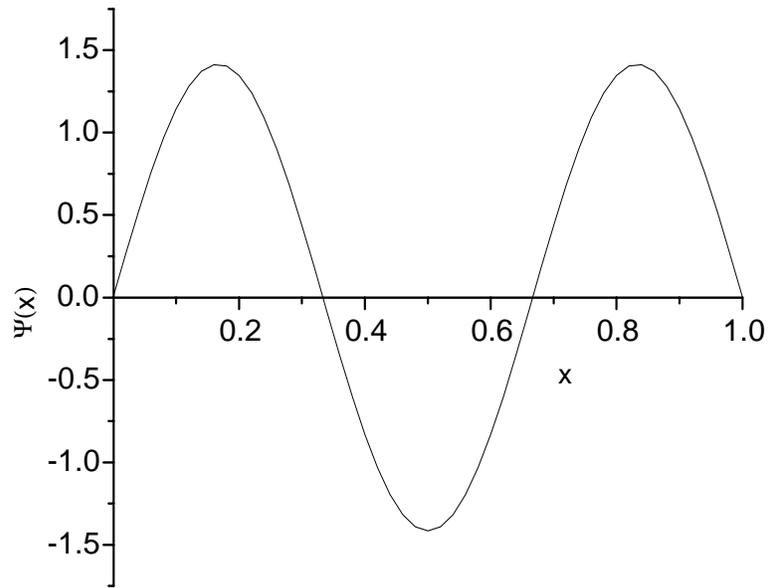


Figura 2.9: Segundo estado excitado para cualquier intensidad

segundo estado excitado, en la cual como ya se explicó anteriormente, es la misma que para el segundo estado excitado en un pozo de potencial infinito, pues la posición de la delta ($\alpha = \frac{1}{3}$) coincide con uno de los nodos de la función de onda, que en este caso se encuentra en el del primer tercio del pozo.

Capítulo 3

Efectos de la aplicación de un campo uniforme.

En este capítulo sometemos al sistema que construimos en el capítulo anterior, a la acción de un campo uniforme, que como es bien conocido, da origen a un potencial lineal. Calculamos las funciones y el espectro de energías lo cual nos permitirá mostrar que la intensidad umbral del potencial delta para que ocurra un estado de energía negativa se modifica.

3.1 Espectro de energías

En este caso consideraremos una caja unidimensional de ancho b con paredes infinitas, en la que actúa un potencial delta de Dirac $-A\delta(x - a)$ y un campo eléctrico constante $\mathbf{E} = \mathbf{F}/q$, que al ser conservativo puede escribirse en términos de un potencial U como $\mathbf{F} = -\nabla U$. Esta ecuación puede integrarse para obtener la energía potencial eléctrica en función de la posición x solamente, debido a que la caja es unidimensional, ésto se hace de la siguiente manera:

$$U(x) = - \int F dx = -Fx. \quad (3.1)$$

De esta manera tenemos que el potencial total de la caja queda dado por: $V(x) = -A\delta(x - a) - Fx$ entonces si tenemos una partícula que se encuentra confinada en la caja, ésta quedaría descrita por la siguiente ecuación de

Schrödinger

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2} [A\delta(x-a) + Fx]\Psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi. \quad (3.2)$$

Ahora, para determinar las soluciones de esta ecuación dividimos el espacio accesible a la partícula en dos regiones 1 y 2, tomando la delta como una frontera, tal y como se hizo en el caso sin campo eléctrico (Capítulo 2). Por lo que al hacer el cambio de variable $\frac{x}{b} = z$ en la ecuación de Schrödinger, ésta queda de la siguiente manera:

$$\frac{d^2}{dz^2}\Psi = \Psi \frac{2mb^2}{\hbar^2} [-Fbz - E], \quad (3.3)$$

la cual al factorizar Fb y considerando que el campo eléctrico se obtiene a partir de una carga negativa, la ecuación de Schrödinger toma la forma siguiente:

$$\frac{d^2}{dz^2}\Psi = -\Psi \frac{2mFb^3}{\hbar^2} \left[z - \frac{E}{Fb} \right], \quad (3.4)$$

en donde hacemos los siguientes cambios de variable: $\frac{2mFb^3}{\hbar^2} = \beta$ y $\frac{E}{Fb} = \epsilon$, por lo que la ecuación de Schrödinger a resolver queda como sigue:

$$\frac{d^2}{dz^2}\Psi = \Psi\beta[z - \epsilon]. \quad (3.5)$$

En esta última ecuación podemos reconocer la forma de una ecuación de Airy (Ver referencia [5]), por lo que damos su solución para las dos regiones de la caja de la siguiente manera:

$$\Psi_1(z) = cAi \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] + dBi \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right], \quad (3.6)$$

$$\Psi_2(z) = fAi \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] + gBi \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right], \quad (3.7)$$

en donde Ai y Bi representan las dos soluciones linealmente independientes de la ecuación (3.5) (Ver referencia [5]). Ahora, para poder dar la solución particular al problema debemos encontrar las cuatro constantes de las dos

ecuaciones anteriores así como los valores de las energías permitidas; para hacer ésto, usamos las condiciones de frontera que las funciones deben de satisfacer dadas por las ecuaciones (2.6-2.9). Notamos que estas ecuaciones forman un sistema de cuatro ecuaciones con cuatro incógnitas, ahora para determinar sus soluciones lo escribimos de forma matricial, para lo cual debemos obtener las derivadas de las funciones de onda:

$$\frac{d\Psi_1}{dz} = c\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Ai \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] + d\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Bi \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right], \quad (3.8)$$

$$\frac{d\Psi_2}{dz} = f\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Ai \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] + g\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Bi \left[\frac{z\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right]. \quad (3.9)$$

Evaluando en la ecuación (2.6), cuando, $z = \frac{a}{b} = \alpha$, e introduciendo los siguientes cambios de variable: $\frac{mbA}{\hbar^2} = \gamma$, y $\frac{\alpha\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} = \xi$ obtenemos:

$$\begin{aligned} & - \left(c\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Ai [\xi] - f\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Ai [\xi] + d\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Bi [\xi] - g\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Ai [\xi] \right) \\ & - 2\gamma \left(c\beta^{\frac{1}{3}} Ai [\xi] + d\beta^{\frac{1}{3}} Bi [\xi] \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ahora, hacemos las mismas sustituciones en términos de los mismos parámetros en las ecuaciones (2.7), (2.8) y (2.9):

$$cAi [\xi] + dBi [\xi] - fAi [\xi] - gBi [\xi] = 0, \quad (3.11)$$

$$cAi \left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] + dBi \left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] = 0, \quad (3.12)$$

$$fAi \left[\frac{\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] + gBi \left[\frac{\beta - \epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}} \right] = 0. \quad (3.13)$$

Con estas últimas cuatro ecuaciones podemos escribir una matriz para este sistema de ecuaciones lineales, tal y como se hizo en el caso donde el campo eléctrico en el capítulo anterior era nulo:

$$\begin{pmatrix} -2\gamma\chi + \beta^{\frac{2}{3}}\frac{d}{dz}\chi & -2\gamma\omega + \beta^{\frac{2}{3}}\frac{d}{dz}\omega & -\beta^{\frac{2}{3}}\frac{d}{dz}\chi & -\beta^{\frac{2}{3}}\frac{d}{dz}\omega \\ \chi & \omega & -\chi & -\omega \\ Bi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] & Bi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] & Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \\ f \\ g \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.14)$$

donde $\chi = Ai[\xi]$ y $\omega = Bi[\xi]$.

Nótese que al analizar la ecuación (3.14) la única manera de que no se tengan soluciones triviales para las constantes c, d, f y g es que el determinante de la matriz sea nulo, y por lo tanto para poder calcular los valores de dichas constantes basta con resolver el sistema lineal y homogéneo para tres ecuaciones, y la última la podremos conocer mediante la condición de normalización de la función de onda. Por lo tanto, al resolver el sistema para c, d y f en términos de g obtenemos lo siguiente:

$$c = \frac{gBi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(-\chi Bi\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] + \omega Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \right)}{AiryAi\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(-\omega Ai\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] + \chi Bi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \right)}, \quad (3.15)$$

$$d = \frac{gAi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(-\chi Bi\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] + \omega Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \right)}{Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(\omega Ai\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] - \chi Bi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \right)}, \quad (3.16)$$

$$f = -\frac{gBi\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right]}{Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right]}. \quad (3.17)$$

Como todas las constantes están descritas en términos de la constante g , entonces podemos dar las funciones de onda que describen completamente al sistema en términos de g recordando que ésta es la constante de normalización, y cuyo valor se puede encontrar de manera numérica para cualesquiera valores de α, β y ϵ .

Como comentamos anteriormente, el determinante de la matriz de la ecuación (3.14) debe de ser nulo, así que tomando esta condición, al calcularlo obtenemos una ecuación trascendente para las energías:

$$\begin{aligned}
0 = g(\epsilon) = & -2\gamma Ai[\xi]^2 Bi\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] Bi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \\
& + Bi[\xi] \left(Ai\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(\beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Ai[\xi] Bi\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] - 2\gamma Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] Bi[\xi] \right) \right. \\
& \left. - \beta^{\frac{1}{3}} Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(\frac{d}{dz} Ai[\xi] \right) Bi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \right) \\
+ & Ai[\xi] \left(Ai\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] Bi\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(2\gamma Bi[\xi] - \beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Bi[\xi] \right) \right. \\
& \left. + Ai\left[\frac{\beta-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] Bi\left[\frac{-\epsilon}{\beta^{\frac{2}{3}}}\right] \left(2\gamma Bi[\xi] + \beta^{\frac{1}{3}} \frac{d}{dz} Bi[\xi] \right) \right). \tag{3.18}
\end{aligned}$$

Esta es una ecuación trascendente, la cual está en función de la variable $\epsilon = \frac{E}{Fb}$ que está directamente relacionada con la energía de la ecuación (3.18). En las gráficas (3.1), (3.2) y (3.3) se muestra $g(\epsilon)$, en donde para cada valor de ϵ en el que $g(\epsilon)$ corte el eje x podremos obtener la energía del sistema, y para cada una de las gráficas se presentan diferentes valores del campo eléctrico (β), de la intensidad (γ) y de la posición de la delta de Dirac (α).

En la figura (3.1) podemos observar que el valor de las raíces se hace mas grande a medida que la intensidad del campo eléctrico aumenta, así mismo la altura de las curvas se incrementa con el valor del campo.

Al observar la figura (3.2) vemos que en este caso, al igual que en el que el campo eléctrico es nulo, tenemos un valor umbral para γ , el cual lo podemos estimar al hacer un desarrollo en serie de la ecuación (3.18) para ϵ hasta tercer orden, (cuya expresión no se presenta aquí por razones de espacio) de esta expresión calculamos las raíces del polinomio de tercer grado para ϵ , cuyas soluciones se encuentran expresadas en términos de la intensidad γ . De esta manera se puede obtener el valor umbral de γ en cualquier caso particular.

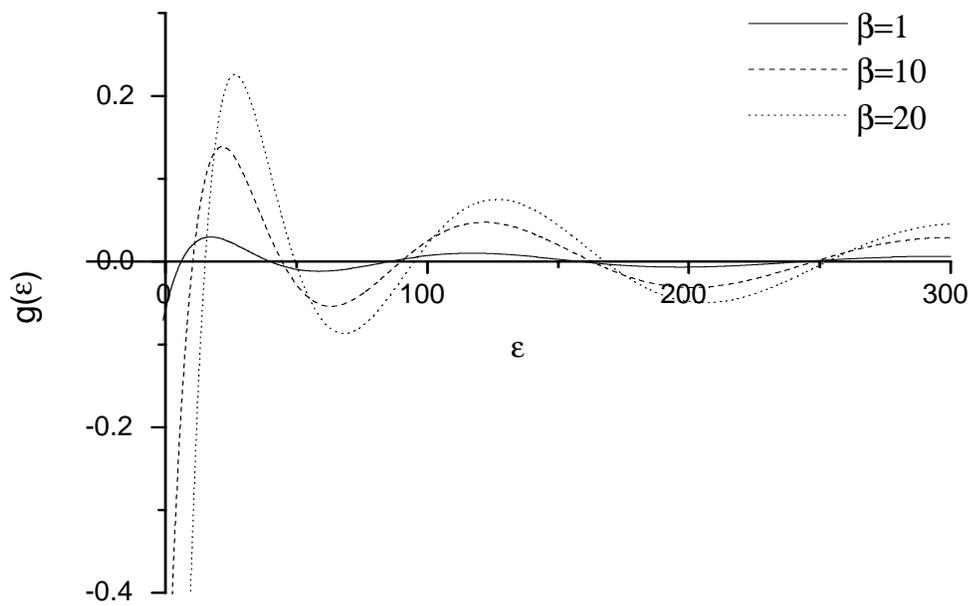


Figura 3.1: Solución gráfica de la ecuación trascendente (3.18) para $\gamma = 1$ y $\alpha = 0.5$ donde las raíces para $\beta = 1$ son: $\epsilon_1 = 5.933$, $\epsilon_2 = 39.978$, $\epsilon_3 = 85.296$, etc. Para $\beta = 10$ son: $\epsilon_1 = 10.349$, $\epsilon_2 = 44.471$, $\epsilon_3 = 89.835$, etc. y para $\beta = 20$ son: $\epsilon_1 = 15.096$, $\epsilon_2 = 49.450$, $\epsilon_3 = 94.953$, etc.

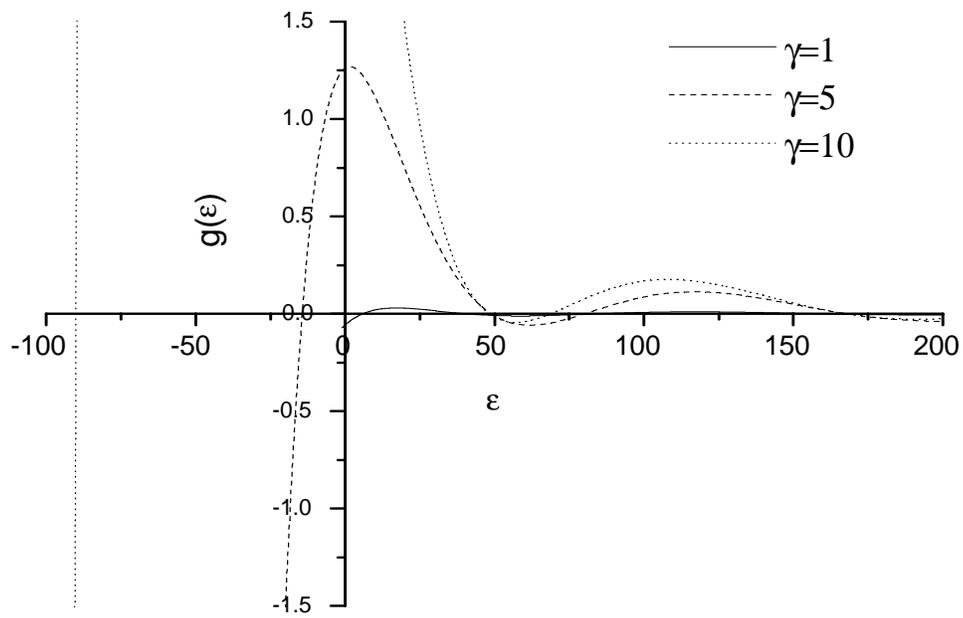


Figura 3.2: Solución gráfica de la ecuación trascendente (3.18) para $\beta = 20$ y $\alpha = 0.5$, donde las raíces para $\gamma = 1$ son: $\epsilon_1 = 15.096$, $\epsilon_2 = 49.450$, $\epsilon_3 = 94.953$, etc. Para $\gamma = 5$ son: $\epsilon_1 = -14.373$, $\epsilon_2 = 48.831$ y $\epsilon_3 = 167.764$, etc. Y para $\gamma = 10$ son: $\epsilon_1 = -89.994$, $\epsilon_2 = 48.123$, $\epsilon_3 = 167.568$, etc.

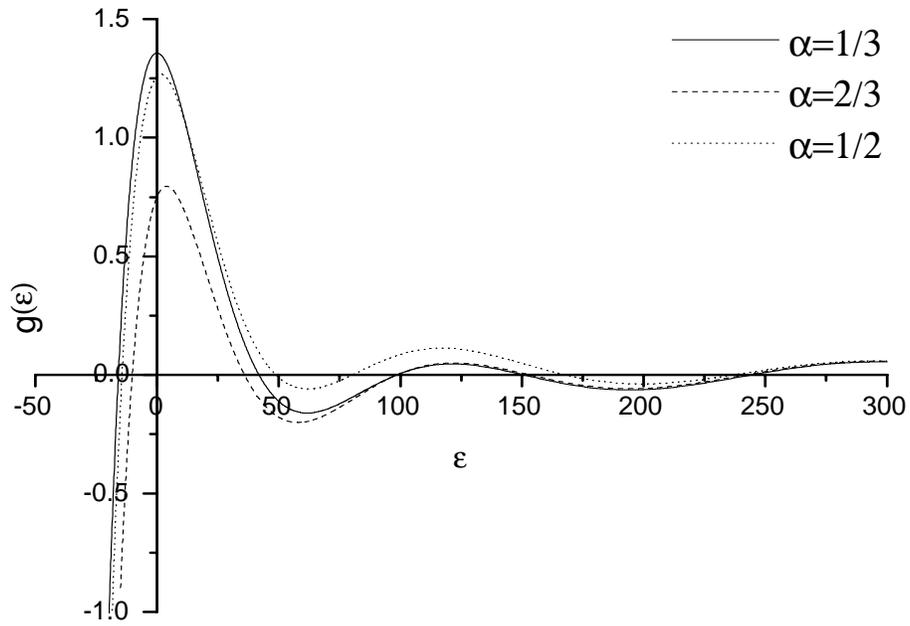


Figura 3.3: Solución gráfica de la ecuación trascendente (3.18) para $\gamma = 5$, $\beta = 20$ y diferentes valores de la posición α , donde para cada uno de ellos sus raíces son las siguientes: para $\alpha = 1/3$: $\epsilon_1 = -15.872$, $\epsilon_2 = 41.8515$, $\epsilon_3 = 98.640$, etc. Para $\alpha = 1/6$: $\epsilon_1 = -10.150$, $\epsilon_2 = 35.951$, $\epsilon_3 = 98.658$, etc. Y para $\alpha = 1/2$: $\epsilon_1 = -14.373$, $\epsilon_2 = 48.831$ y $\epsilon_3 = 167.764$, etc.

Por ejemplo, si damos valores arbitrarios como: $\alpha = \frac{1}{2}$ y $\beta = 2$ se obtienen las siguientes soluciones del polinomio:

$$\begin{aligned} \epsilon &= 0, \\ \epsilon &= \frac{0.5 \left(0.0014 - 0.05\sqrt[3]{-4.1314 + \gamma}\sqrt[3]{-2.1635 + \gamma} - 0.0002\gamma \right)}{-0.1889 + 0.0873\gamma}, \\ \epsilon &= \frac{0.5 \left(0.0014 + 0.05\sqrt[3]{-4.1314 + \gamma}\sqrt[3]{-2.1635 + \gamma} - 0.0002\gamma \right)}{-0.1889 + 0.0873\gamma}. \end{aligned} \tag{3.19}$$

De los resultados anteriores se observa que las condiciones para que las energías sean reales son que:

$$-4.158 + \gamma > 0 \text{ y } -2.38548 + \gamma > 0 \Rightarrow 4.158 > 0 \text{ y } 2.38548 > 0,$$

de donde notamos que en este caso particular el límite inferior para la intensidad es $\gamma = 4.158$. Cabe mencionar que haciendo las aproximaciones numéricas, se encontró que, para cuando el campo eléctrico disminuye, es decir cuando $\beta \rightarrow 0$, el límite de la intensidad tiende a cuatro, $\gamma \rightarrow 4$, es decir recuperamos el caso donde el campo eléctrico es nulo (Ver capítulo 2).

3.2 Funciones de onda propias

Como vimos anteriormente, tenemos tres parámetros adimensionales que controlan nuestro sistema, los cuales son la intensidad del campo eléctrico β , la intensidad de la delta γ , y la posición α , así que se variaron cada uno de los tres parámetros para poder analizar el comportamiento de las soluciones en cada caso.

Primero, analizamos el estado base para diferentes valores del campo eléctrico cuando $\gamma = 1$ y $\alpha = 0.5$, para ello requerimos las primeras raíces de las tres gráficas presentadas en la figura (3.1), dichos valores se sustituyen en las ecuaciones (3.6) y (3.7) y obtenemos las gráficas del estado base para estos casos, los cuales se presentan en la figura (3.4). En dicha figura notamos en

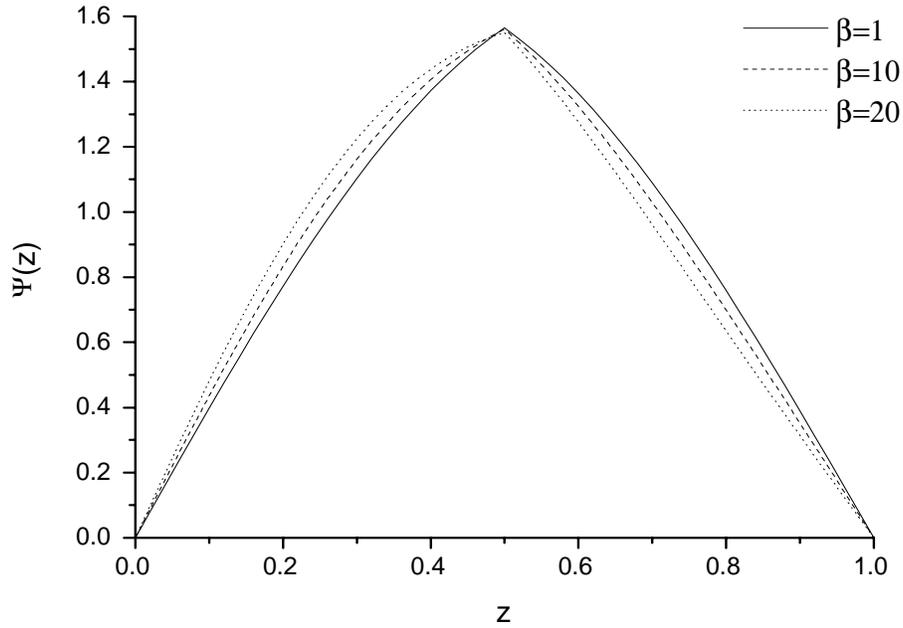


Figura 3.4: Estado base para $\gamma = 1$ y $\alpha = 0.5$ y diferentes valores de β .

En cada una de las tres gráficas se observa la presencia de un punto de discontinuidad en su derivada, al igual que para el caso donde el campo eléctrico era nulo, pero además notamos que a medida que se aumenta la intensidad del campo eléctrico las gráficas presentan una asimetría hacia el costado izquierdo, lo cual se debe a que el campo eléctrico es lineal y creciente.

Presentamos la gráfica del primer estado excitado para los mismos valores de los parámetros en la figura (3.5). Notamos que se mantiene la asimetría que se presentaba en el estado base, lo cual lo observamos en el nodo de cada gráfica, pues a medida que se aumenta la intensidad del campo eléctrico dicho nodo se mueve hacia la izquierda.

Por último presentamos el segundo estado excitado para el mismo caso

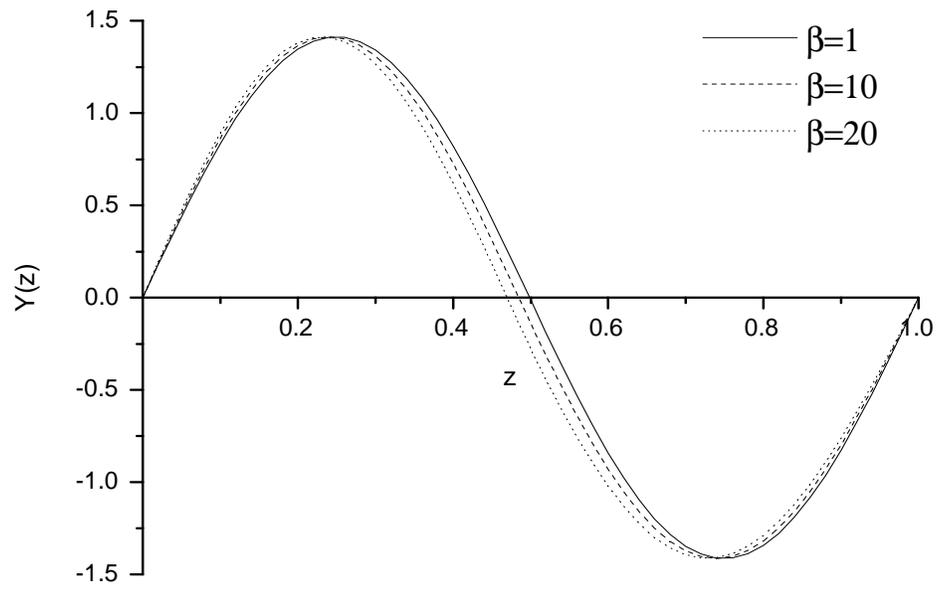


Figura 3.5: Primer estado excitado para $\gamma = 1$ y $\alpha = 0.5$, y diferentes valores de β .

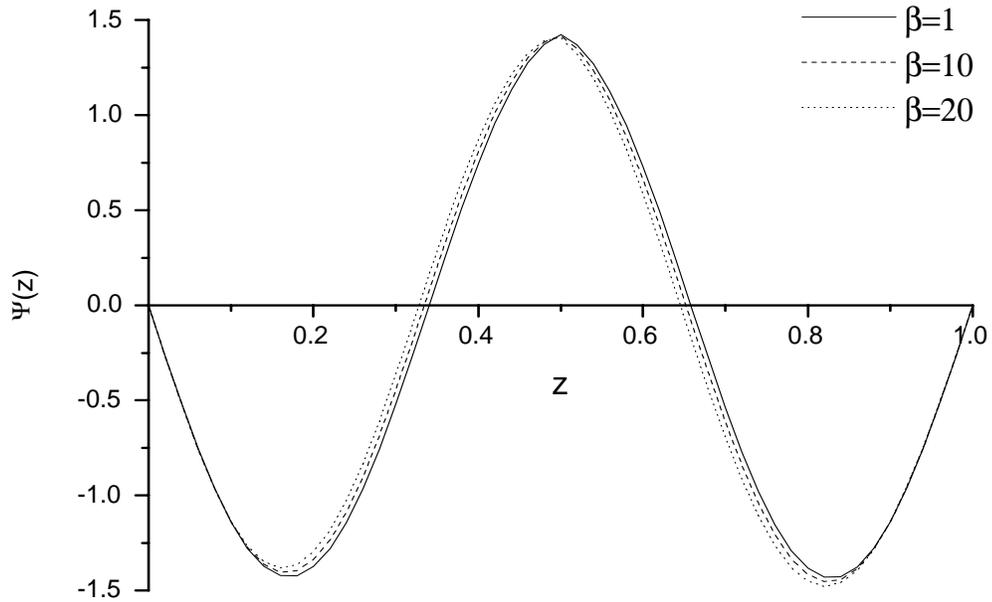


Figura 3.6: Segundo estado excitado para $\gamma = 1$ y $\alpha = 0.5$ para diferentes intensidades del campo eléctrico β .

que los anteriores en la figura (3.6). Notamos nuevamente la asimetría en las posiciones de los nodos al moverse a la izquierda. Esta asimetría se debe a la presencia del campo eléctrico, pues éste actúa como un pozo cuya profundidad cambia linealmente de tal forma que, si la partícula tiene la suficiente energía, su función de onda oscila en todo el pozo; pero si la energía es menor, su función de onda puede ser evanescente en las regiones en donde su energía sea menor que el potencial lineal.

Ahora analizamos lo que sucede cuando variamos la intensidad de la delta y dejamos fijo el valor del campo eléctrico. Comenzamos nuevamente con el estado base en la figura (3.7), en la cual notamos la presencia de la delta como un punto de discontinuidad en su derivada, la cual se hace mas pronunciada

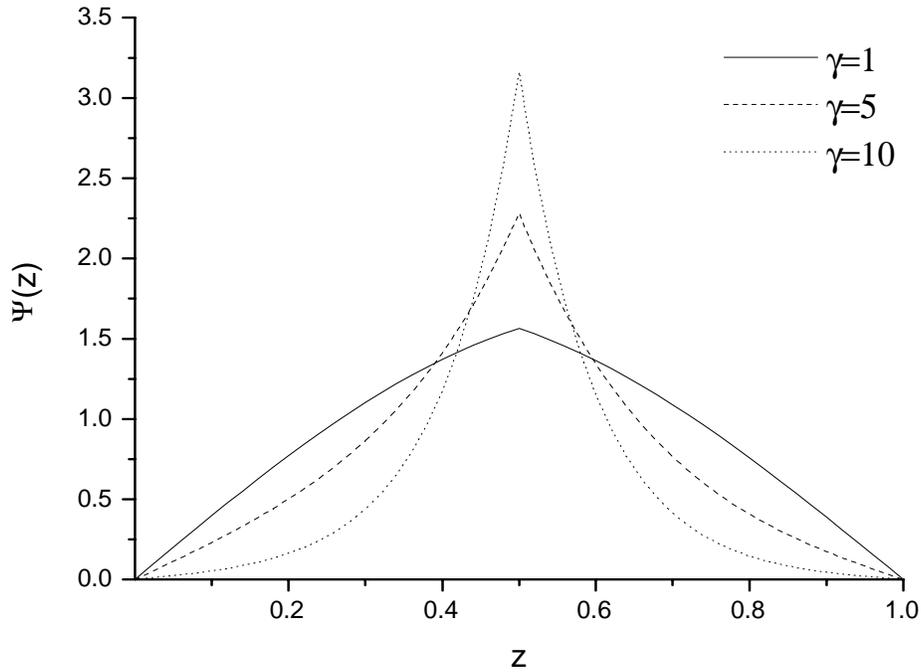


Figura 3.7: Estado base para $\beta = 20$ y $\alpha = 0.5$, para varios valores de la intensidad γ .

conforme aumenta la intensidad. Notamos también que la curva cuya intensidad es $\gamma = 1$, que está por debajo del umbral, tiene una concavidad del mismo signo que las funciones seno y coseno, mientras que para valores de γ por arriba del umbral, las curvas correspondientes cambian el signo de su concavidad; de tal forma que se asemejan a funciones exponenciales. Esto es, el comportamiento cualitativo encontrado en ausencia del potencial lineal (Capítulo 2) se sigue manteniendo en presencia de éste, pero aparece una asimetría de las funciones de onda respecto al centro del pozo.

En la figura (3.8) para el primer estado excitado, notamos que a medida que se aumenta la intensidad de la delta, la altura de las gráficas al lado izquierdo

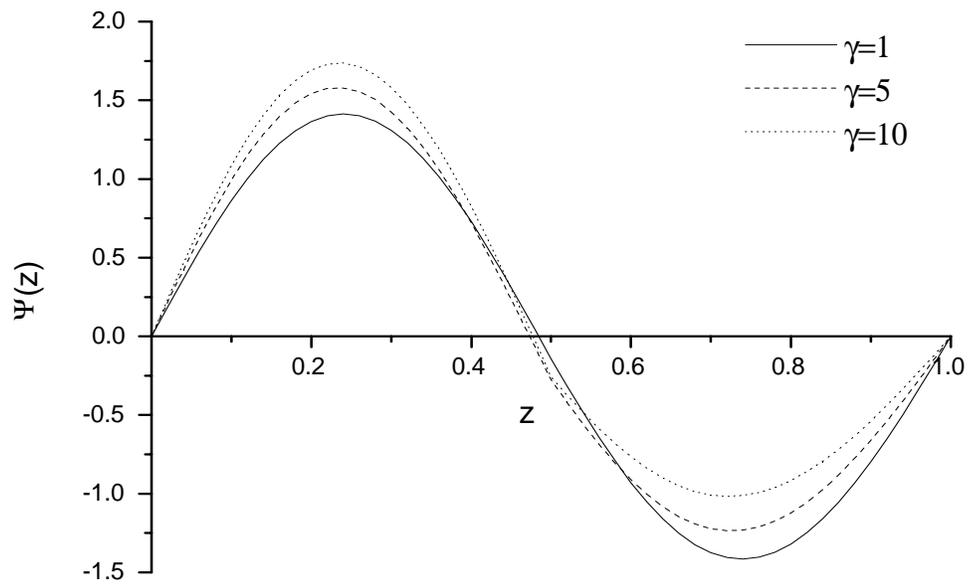


Figura 3.8: Primer estado excitado para $\beta = 20$ y $\alpha = 0.5$, para diferentes valores de la intensidad γ .

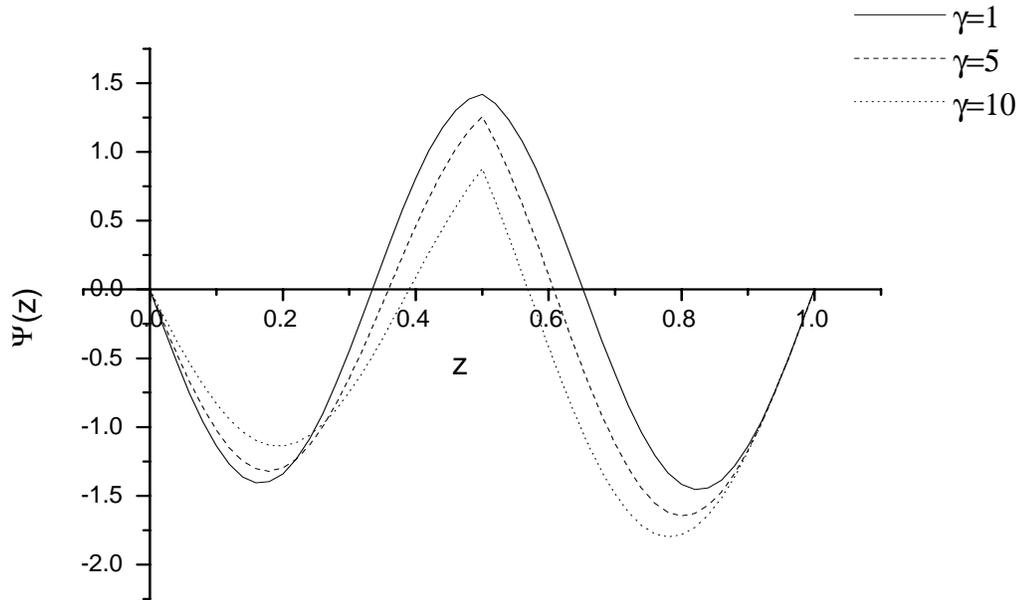


Figura 3.9: Segundo estado excitado para $\beta = 20$ y $\alpha = 0.5$ para diferentes valores de la intensidad γ .

del centro aumenta y del lado derecho disminuye, siendo el campo eléctrico el responsable de la asimetría en las curvas.

Finalmente se presenta la gráfica de los segundos estados excitados en la figura (3.9), donde se nota que notamos que la presencia de la delta se hace cada vez más evidente a medida de que aumenta su intensidad.

Siendo la posición de la delta el único parámetro que falta por variar, utilizamos los datos de la figura (3.3) para obtener las gráficas de las funciones de onda. Comenzamos con el estado base en la figura (3.10), en la cual notamos que debido a que la intensidad de la delta es la misma para las tres gráficas, entonces la altura de las funciones laterales es un poco menor, también varía la forma de las curvas ya que las curvas laterales son más asimétricas. De hecho, dentro de la escala de la gráfica, la curva derecha parece ser el reflejo

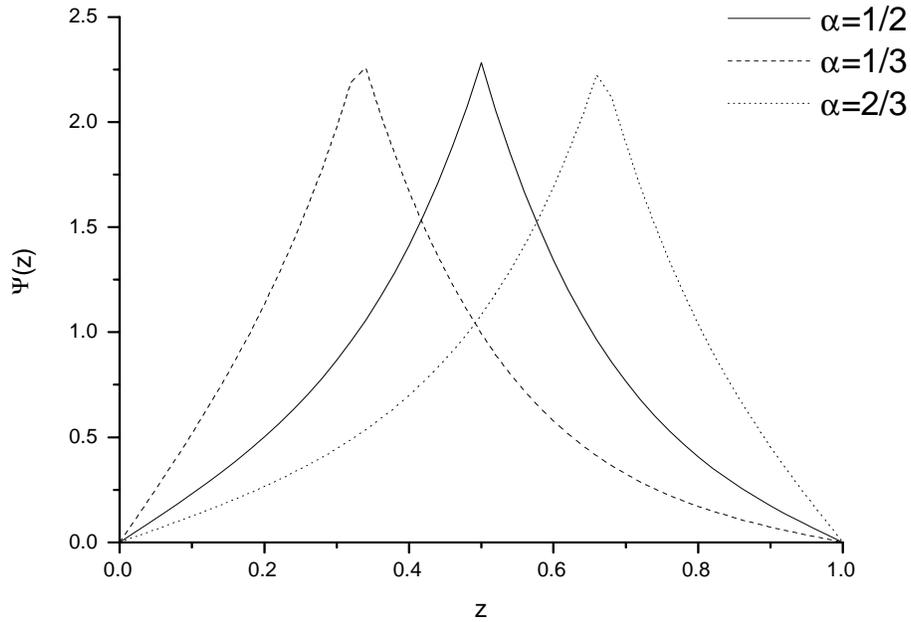


Figura 3.10: Estado base para $\gamma = 5$, $\beta = 20$ y varios valores de α .

de la curva izquierda respecto a un espejo que pasa por el centro del pozo. Esto se debe a que cuando la posición de la delta deja de ser $\alpha = 1/2$, toda la situación deja de ser simétrica por lo que la función de onda pierde simetría con respecto al eje z .

Ahora, analizamos el primer estado excitado en la figura (3.11), en la que encontramos nuevamente que la presencia de la delta se encuentra desplazada según la posición determinada.

Por último analizamos el segundo estado excitado en la figura (3.12), en la que nuevamente notamos la presencia de la delta en diferentes posiciones y aún se nota una asimetría en todas ellas debido a la presencia del campo eléctrico.

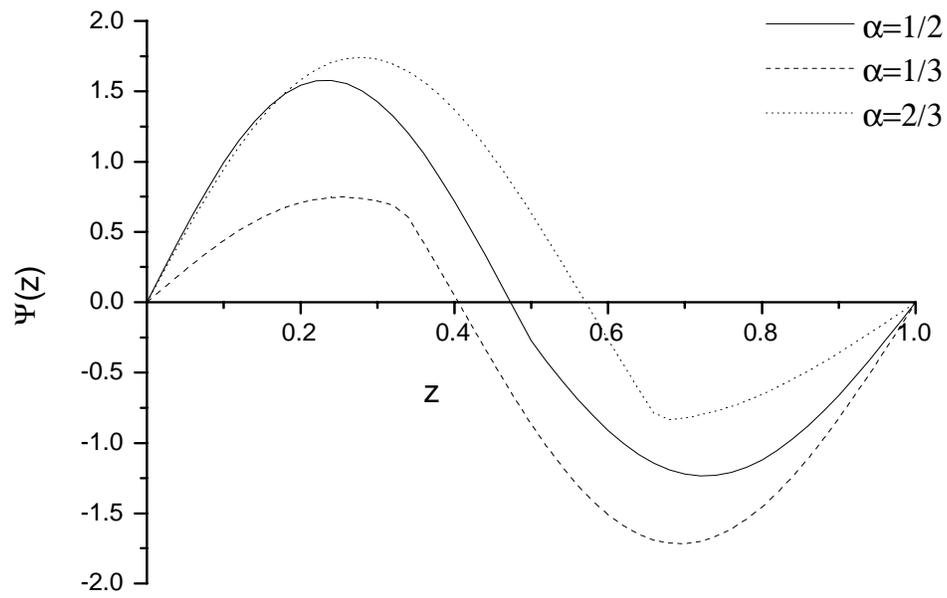


Figura 3.11: Primer estado excitado para $\gamma = 5$, $\beta = 20$ y varios valores de la posición α .

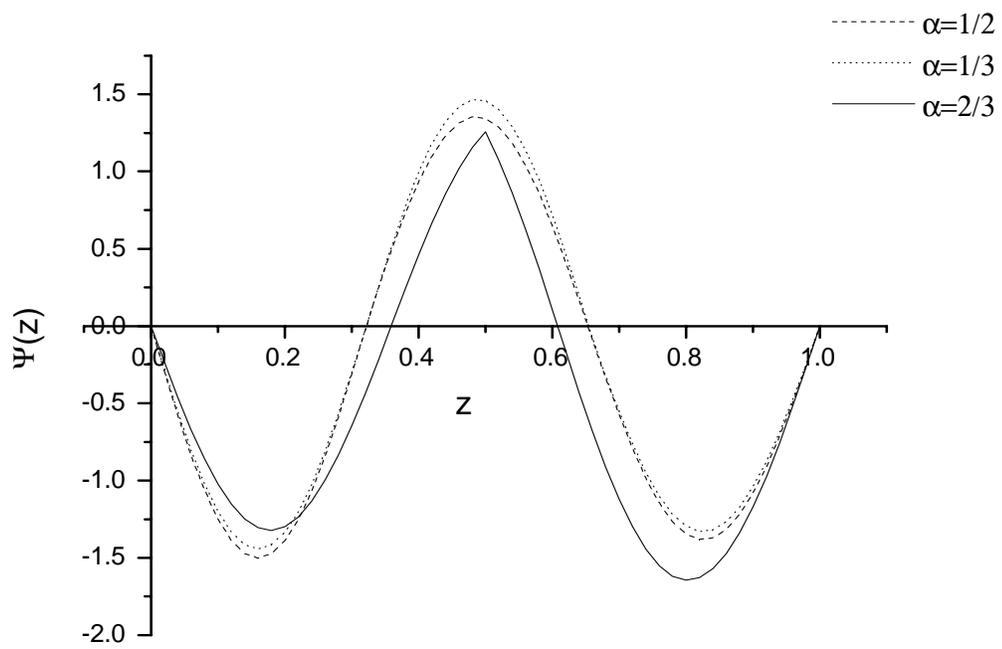


Figura 3.12: Segundo estado excitado para $\gamma = 5$, $\beta = 20$ y varios valores de la posición α

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo se planteó y resolvió la ecuación de Schrödinger de un sistema cuántico en el que una partícula unidimensional está confinada por un pozo de paredes infinitas y a su vez está sometida a la acción de un potencial puntual atractivo. Calculamos las funciones propias estacionarias del sistema y encontramos el espectro de energías, el cual resultó estar formado no sólo por un espectro infinito y discreto de energías positivas, sino que además incluye un estado de energía negativa que, en consecuencia, resulta ser el estado base. Dicho estado sólo existe a partir de un cierto valor umbral para la intensidad del potencial puntual, el cual es función del parámetro de la posición de dicho potencial, y diverge cuando esta posición coincide con uno de los extremos del pozo. La función de onda asociada a este estado es una combinación lineal de funciones exponenciales, la cual presenta un pico en la posición del potencial puntual. Las funciones de onda asociadas a los otros estados propios del sistema son combinaciones lineales de funciones senos y cosenos que cumplen las condiciones de frontera correspondientes, particularmente las condiciones en la posición del potencial puntual que dan origen a una discontinuidad en la derivada de la función de onda en tal punto. Sin embargo, si la función de onda tiene un nodo que coincide con la posición del potencial puntual, ésta y su energía propia se reducen a la función de onda y al valor propio corres-

pondientes a un pozo simple (sin potencial puntual). Así, por ejemplo, si el potencial puntual está en el centro del pozo, las funciones de onda y energías propias correspondientes coinciden con las del pozo de potencial infinito.

Adicionalmente, estudiamos el efecto de imponer un potencial lineal al sistema que pudiera representar un campo eléctrico uniforme actuando sobre una partícula cargada. Resolvimos, nuevamente de manera analítica, el problema de valores propios para determinar los estados propios del sistema que se pueden expresar en términos de funciones de Airy. Mostramos que el estado con energía propia negativa sigue existiendo bajo la acción de este potencial lineal y requiere también de un valor umbral del potencial puntual para existir. Este valor, dependerá ahora del parámetro asociado al campo, sin embargo su análisis está en proceso.

A pesar de que bajo la acción del campo las funciones de onda asociadas a energías, tanto positivas como negativas, se expresan ambas en términos de funciones de Airy, su dependencia es similar a la de funciones trigonométricas, para las primeras, y exponenciales, para las segundas. Es decir, el comportamiento cualitativo de las funciones propias es similar al encontrado en ausencia de campo, pero en este caso las funciones de onda muestran una asimetría respecto al centro del pozo que es consecuencia y proporcional a la acción del campo eléctrico.

Bibliografía

- [1] M. J. Kelly, *Low-Dimensional Semiconductors. Materials, Physics Technology, Devices* Clarendon Press, Oxford Science Publications (1995) , pp. 61-72.
- [2] G. Arfken, *Métodos matemáticos para físicos*, 1a. ed., (Diana, D.F., 1981), pp. 871-881.
- [3] G. Arfken, *Métodos matemáticos para físicos*, 1a. ed., (Diana, D.F., 1981), pp. 476-479.
- [4] J. Marsden y M. Hoffman. *Análisis Básico de Variable Compleja*, 1a. ed., (Trillas, D.F., 1996), pp. 270 y 275-276.
- [5] M. Abramowitz e I. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, 9a. Ed., (Dover Publications, Inc., Nueva York, 1972), pp. 446-447.
- [6] M. Alonso y E. Finn, *Física Volumen III: Fundamentos cuánticos y estadísticos*, (Fondo Educativo Panamericano, Massachusetts, 1971), pp. 66-70.
- [7] M. de Llano, *Mecánica Cuántica*, 2a. ed., (Facultad de Ciencias UNAM, D.F., 2002), pp. 45-46.
- [8] R. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*, 3a. ed., (Addison-Wesley, Massachusetts, 1998), p. 229.

- [9] P. Roman, *Advanced Quantum Theory*, 1a ed. (Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Massachusetts, 1965), pp. 150-155.
- [10] L. De la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica*, 2a. ed., (UNAM-Fondo de Cultura Económica, D.F., 1991), pp. 109-111
- [11] F. Constantinescu y E. Magyari. *Problems in Quantum Mechanics*, 1a ed., (Pergamon Press, Hungría, 1971), pp. 28 y 54-55